



Primljeno: 12.12.2016.

Klasifikacijski broj: 643-02/16-02/0003

Upriznjenje: 289-2016-01-02/16-0010

Poslijediplomski sveučilišni studij biofizike

## PROTOKOL I ZAPISNIK OBRANE DOKTORSKOG RADA

Povjerenstvo ulazi u prostor za obranu, doktorand stoji ispred Povjerenstva. Članovi Povjerenstva i ostali nazočni sjednu, a potom Predsjednik čita:

*Poštovana pristupnice, članovi Povjerenstva, drage kolege i ostali nazočni,  
ustanovljujem da će danas 19. 12. 2016. doktorandica*

**ŽELJKA SANADER**

*na Sveučilištu u Splitu, Prirodoslovno-matematičkom fakultetu, s početkom u 8:15 sati braniti svoj doktorski rad s naslovom:*

Naslov doktorskog rada:	Hrvatski:	Optička svojstva nanoklastera plemenitih metala unutar hibridnih sustava i njihova primjena u biosenzorici
	Engleski:	Optical properties of noble metal nanocluster hybrids and their potential for biosensing
	Jezik pisanja rada:	Engleski jezik

*izrađen pod mentorstvom:*

	Titula, ime i prezime :	Ustanova, država:
Prvi mentor:	prof. dr. sc. Paško Županović	Prirodoslovno-matematički fakultet, Split, Hrvatska
Drugi mentor:	prof. dr. dr. h. c. Vlasta Bonačić-Koutecký [honoris causa]	Sveučilište u Splitu

*Doktorski rad doktorand/doktorandica će braniti pred Povjerenstvom za obranu doktorskog rada u sastavu:*  
(ukoliko je obrani prisustvovao zamjenski član, uz podatke zamjenskog člana navedite i podatke člana kojeg zamjenjuju)

Izabrano povjerenstvo za obranu doktorskog rada	Titula, ime i prezime:	Ustanova, država:
	<b>Predsjednik Povjerenstva:</b> prof. dr. sc. Ante Bilušić	Prirodoslovno-matematički fakultet, Split, Hrvatska
	2. prof. dr. sc. Franjo Sokolić, član	Prirodoslovno-matematički fakultet, Split, Hrvatska
	3. dr. sc. Mile Ivanda, zamjenski član (dr. sc. Anita Kriško, član)	Institut Ruđer Bošković, Zagreb, Hrvatska
	4.	
	5.	

*koje je Fakultetsko vijeće Prirodoslovno-matematičkog fakulteta Sveučilišta u Splitu imenovalo dana:*



28. rujna 2016. g. na 110. sjednici  
(upisati broj i datum održavanja sjednice Fakultetskog vijeća)

*Doktorski rad prihvatilo je Fakultetsko vijeće Prirodoslovno-matematičkog fakulteta Sveučilišta u Splitu dana:*

30. studenog 2016. g. na 112. sjednici  
(upisati broj i datum održavanja sjednice Fakultetskog vijeća)

*a na prijedlog izabranog povjerenstva za ocjenu doktorskog rada u sastavu:*

Sastav povjerenstva za ocjenu doktorskog rada	Titula, ime i prezime:	Ustanova, država:
	<b>Predsjednik Povjerenstva:</b> prof. dr. sc. Ante Bilušić	Prirodoslovno-matematički fakultet, Split, Hrvatska
	2. prof. dr. sc. Franjo Sokolić, član	Prirodoslovno-matematički fakultet, Split, Hrvatska
	3. dr. sc. Anita Kriško, član	Mediteranski institut za istraživanje života, Split, Hrvatska
	4.	
	5.	

*Prije obrane iznijet ću životopis predloženice, popis radova i ocjenu rada.*

**Predsjednik čita životopis doktoranda/doktorandice i popis radova:**

2006-2009 Prvostupnica matematike i fizike, PMFST, Sveučilište u Splitu  
2009-2011 Magistra fizike, usmjerenje: biofizika, PMFST, Sveučilište u Splitu  
2011- doktorska studentica na doktorskome studiju Bofizika, PMFST, Sveučilište u Splitu  
2011-2013 Znanstveni novak na ICAST-u  
2013- Asistentica na Prirodoslovno-matematičkom fakultetu, Sveučilište u Splitu

Sudjelovala je na jednoj konferenciji i jednoj radionici

2008 Rektorova nagrada

2010-2011 Top stipendija pod pokroviteljstvom Nacionala

2013 Stipendija Francuske vlade za studijski boravak na Sveučilištu Claude Bernard, Lyon, Francuska

Objavila je ukupno 7 radova na kojima je na njih 3 prvi autor. Svi su redom objavljeni u časopisima s visokim čimbenikom utjecaja.

**Predsjednik čita obrazloženje ocjene doktorskog rada:**

Doktorska disertacija pristupnice Željke Sanader pisana je po „skandinavskom modelu“ koji uz prvo, uvodno poglavlje uključuje pet znanstvenih radova (svaki je rad jedno poglavlje) te posljednje, sedmo, poglavlje sa zaključcima i perspektivom za daljnja istraživanja. Uz to, rad sadrži i dva dodatka s dva znanstvena rada kao posebnim poglavljima-dodacima. Rad je pisan na engleskom jeziku, sadrži 85 stranica, 33 slike, 4 tablice, 2 sheme i 115 bibliografskih jedinica.

Glavni je cilj rada teorijsko objašnjenje linearnih i nelinearnih optičkih svojstava hibridnih sustava malih metalnih nanoklastera te njihovom potencijalnom primjenom za biooslikavanje i biosenzoriku. Prvo, uvodno poglavlje najprije daje opis koncepta nanoklastera kao biosenzora i načina biooslikavanja da bi se potom opisale metode proizvodnje uzoraka te njihove eksperimentalne i teorijske karakterizacije. Potom slijede dva potpoglavlja s detaljnim opisima mehanizama linearnih i nelinearnih optičkih karakteristika nanoklastera te naposljetku opis upotrijebljenih teorijskih metoda (teorija funkcionala gustoće i njena vremenski ovisna varijanta).

U drugom i trećem poglavlju prikazani su rezultati linearnih optičkih svojstava aromatskih prstena i hibrida histidina sa srebrom.



Utjecaj različitih iona je u drugom poglavlju modeliran za slučaj 2,4-DNPH koji se javlja u dva izomera.

Tema trećeg poglavlja je izučavanje povećanja detekcije koncentracije i svojstava histidina, vrlo važne amino-kiseline čija neravnoteža ukazuje na mogućnost različitih bolesti. Pokazano je da se nanoklasteri srebra poglavito vežu uz amino i karboksilne grupe histidina. Nadalje, određene su glavne vrste elektronskih ekscitacija u hibridima srebra i histidina. Svojstvima srebrenih nanoklastera se bavi i dodatak, i to na način da su istraživana svojstva apsorpcijskih spektara nanoklastera zaštićenima ligandima tioglikolne kiseline. Teorijski modeli su testirani eksperimentima, što je rezultiralo protokolima za kontroliranu proizvodnju liganada metalnih nanoklastera s dobro definiranim brojem elektrona vezanih uz jezgru nanoklastera.

U četvrtom, petom i šestom poglavlju nudi se važan doprinos razumijevanju inače vrlo izraženih nelinearnih optičkih svojstava metalnih nanoklastera na primjerima ligiranih nanoklastera  $Ag_{15}$  i  $Ag_{29}$ . Proračuni napravljeni za nanoklastere  $Ag_{29}$  ligiranih dihidrolipoinskom kiselinom pokazuju kvalitativno slaganje s eksperimentima načinjenim u području UV-VIS-NIR te ukazuju na važnost dvofotonske apsorpcije. S ciljem detaljnije analize parametara koji utječu na udarni presjek dvofotonske apsorpcije ligiranih srebrenih nanoklastera, izučavan je sustav  $Ag_{15}SH_{11}$ . Proračuni, koji se slažu s eksperimentalnim rezultatima, ukazuju da je veliki udarni presjek dvofotonske apsorpcije posljedica rezonantnih efekata valne duljine jednofotonskog prijelaza s tanja  $S_1$  i valnih duljina dvaju upadnih fotona. Ova su istraživanja potaknula daljnja teorijska istraživanja nanoklastera srebra ( $Ag_{11}$ ,  $Ag_{15}$  i  $Ag_{31}$ ), koja su pokazala da rezonantni efekti između jedno- i dvo-fotonskih apsorpcijskih učinaka dovode do generiranja velikog prijelaznog dipolnog momenta koji je svojstven sustavima s nejednolikom raspodjelom elektrona u nanoklasteru.

Sažetci doktorskog rada, dani na hrvatskom i engleskom jeziku, precizno ističu njegove glavne rezultate. Navedena literatura je odgovarajuća i iscrpna. Mišljenja smo da doktorska disertacija Željke Sanader predstavlja originalni znanstveni doprinos i zadovoljava sve uvjete da bude prihvaćena. Poznate znanstvene činjenice su obrazložene jasno i sustavno te popraćeni odgovarajućim izborom znanstvene literature. Rezultati istraživanja, prikazani u obliku šest objavljenih i jednog znanstvenog članka poslanog na recenziju, su jasni i pregledni, a korištene metode detaljno su opisane u uvodnom (prvom) te sažeto, sukladno pravilima pisanja znanstvenih radova, u kasnijim poglavljima (od drugog do šestog). Posebno ističemo činjenicu da se teorijska modeliranja načinjena u sklopu ovoga rada potvrđena nizom eksperimenata. Važan rezultat ove disertacije je da se prikazani rezultati mogu primijeniti u unapređenju korištenja metalnih nanoklastera kao biosenzorske i tehnike biooslikavanja.

Nakon što je pročitao Izvještaj, Predsjednik daje riječ doktorandu/doktorandici riječima:

*Pozivam doktorandicu da pristupi obrani doktorskog rada.  
Upozoravam je da se njeno izlaganje neće prekidati, a može trajati najviše 45 minuta.*

**Nakon izlaganja** predsjednik pita doktorandicu želi li odgovarati na pitanja odmah ili nakon kraće stanke (10 do 15 minuta).

Odmah ili nakon stanke, predsjednik moli članove Povjerenstva da postave pitanja iz područja istraživanja.

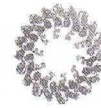
Na kraju predsjednik postavlja pitanja doktorandu (pitanja se prilažu Zapisniku).

Članovi povjerenstva pismeno priopćuju pitanja na koje treba odgovoriti.

Predsjednik je pozvao i ostale nazočne da postave pitanja uz prethodno predstavljanje (pitanja se prilažu Zapisniku).

Nakon što je doktorandica odgovorila na postavljena pitanja Predsjednik povjerenstva priopćuje da je postupak obrane završen i moli povjerenstvo da se povuče na vijećanje:

*Ukoliko nema više pitanja, proglašavam obranu doktorskog rada završenom i predlažem da se  
Povjerenstvo povuče na vijećanje.*



Nakon vijećanja, članovi Povjerenstva ulaze pri čemu nazočni ustaju i stoje tijekom čitanja odluke.  
Predsjednik čita odluku Povjerenstva:

Ovo povjerenstvo nakon javno obranjenog doktorskog rada donijelo je jednoglasno (većinom glasova) (podvući)

**ODLUKU**

da je

**ŽELJKA SANADER**

*obranila svoj doktorski rad.*

*Povjerenstvo će zamoliti rektora Sveučilišta u Splitu da*

**ŽELJKU SANADER**

*promovira u najviše akademsko zvanje*

**DOKTORICA ZNANOSTI**

**iz znanstvenoga područja prirodnih znanosti,**

**znanstvenoga polja fizika**

Obrana je završena u 9:30 sati.

U Splitu, 19. prosinca 2016.

Članovi Povjerenstva:

(ime, prezime, potpis članova Povjerenstva za obranu doktorskog rada)

2. **prof. dr. sc. Franjo Sokolić**

3. **dr. sc. Mile Ivanda**

Predsjednik Povjerenstva:

**prof. dr. sc. Ante Bilušić**

(ime, prezime, potpis Predsjednika Povjerenstva za obranu doktorskog rada)



Prilog:

Pitanja Povjerenstva za obranu doktorskog rada	
2. član: dr. sc. Mile Ivanda	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Navesti glavne efekte (kvantnomehaničke, elektronske i optičke) smanjenja čestica na naoskali!</li> <li>• Objasniti faktor pojačanja Ramanovog efekta raspršenja uzrokovano plazmanskim pobudama na metalnim nanočesticama, tzv. SERS efekt!</li> <li>• Histamin, histidin – po čemu se molekule razlikuju te je li se može očekivati da je SERS pojačanje istog reda veličine, odnosno može li se očekivati isti SERS efekt za slične molekule?</li> </ul>
3. član: prof. dr. sc. Franjo Sokolić	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Rekli ste da se interakcija između molekula ne može analitički opisati? Možete li objasniti?</li> <li>• Računali ste linearna optička svojstva DNPH u prisustvu <math>Ag^+</math>, <math>H^+</math> i naboja. Kako se opisuje prisustvo naboja?</li> <li>• NLO: usporedba teorijskih i eksperimentalnih rezultata!</li> </ul>
Predsjednik Povjerenstva: prof. dr. sc. Ante Bilušić	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Objasniti slaganje teorije i eksperimenta!</li> <li>• Objasniti zašto se podvrgavanjem električnom polju dodaje naboj! Je li riječ o delokalizaciji naboja? Ako jest, koliko je minimalno polje potrebno za „otkidanje“ elektrona?</li> <li>• Zna li kolika je dubina prodiranja infra-crvenog zračenja u ljudski tkivo radi potencijalne primjene DPA?</li> </ul>

Pitanja nazočnih	
prof. dr. sc. Paško Županović (ime i prezime)	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Objasnite DFT!</li> <li>• Kako se modelira potencijal između naboja?</li> </ul>
prof. dr. dr. h. c. Vlasta Bonačić-Koutecký (ime i prezime)	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Kako je opisana elektronska korelacija u DFT-u i zašto je važna?</li> <li>• Zašto je izabran DNPH?</li> <li>• Koji Vam je segment istraživanja bio najdraži?</li> </ul>

1. Navesti glavne efekte (kvantno-mehaničke, elektronske i optičke) umnoženja čestica na nanostali.
2. Objasniti faktor pojačanja Ramanovog efekta vezanog za uzdužno polarizirani pobudena na metalnim nanočesticama, tzv. SERS efekt.
3. Histamin, histidin - po čemu se molekule razlikuju te je li se može očekivati da je SERS pojačanje istog reda veličine, odnosno pitanje je je li se može očekivati isti SERS efekt za slične molekule.

---

nitrobenzen / nitrobenzol? stabilnost ~~metil~~ nitrobenzen  
 metil-ovojstke molekule?  
 dipolni moment se može pojačati uzdužnim poljem

## Titanyl Sokolic

1. Rekli ste da se interakcija između elektrona ne može analitički opisati. Možete li objasniti?
2. Računali ste linearna optička svojstva DNPH u prisustvu  $\text{Ag}^+$ ,  $\text{H}^+$  i naboja. Kako se opisuje prisustvo naboja?
3. NLO: usporedba teorijskih i eksperimentalnih rezultata.

Elektroneninteraktioner kan inte beskrivas  
analytiskt.

LO svårhanterat. Utgångspunkt



- Objasniti slaganje teorije i eksperimenta!
- Objasniti zašto ne podupravljaju električnu polju dodaje naboj?  
Je li nječa o delokalizaciji elektrona? Ako jest, kako bi bilo min. polje potrebno za "otkladanje" elektrona?
- Znate li kaklika je klasina prednja IC-začaja u gradivo ~~na~~ tkivo udi potencijalne primjene DPA?

Pitaya public

- Objasniti DFT!
  - Kako se modelira potencijal atome u molekula? } Zašto Zupović
  - Kako je opisana elektronska korelacija u DFTu i zašto je važna? }
  - Zašto je izazvan DNTH? }
  - Što vam je bilo ~~mojdrje~~ ~~isti~~ ~~istinitije~~ segment istraživanja bio mojdriji? }
- Vlanka  
Bona  
Kralj